BKT転移とその周辺(新奇な秩序を持つ系での相転移,研究会報告)

野村, 清英

BKT 転移とその周辺

野村清英
九州大学理学部

概 要

連続体対称性を伴う量子 1 次元系（もしくは有限温度の 2 次元系）の相転移として、最初に BKT 転移とレベルスペクトロスコピー、次に 2 次相転移の一種ではあるが対数補正を伴う c=3/2 の相転移について述べる。

1　BKT 転移とレベルスペクトロスコピー

絶対温度零度の量子 1 次元系（量子スピン系、電子系など)、あるいは有限温度の古典 2 次元系（古典 XY モデル、ラフニング転移、超伝導薄膜など）において、回転対称性・位相のような連続的対称性に関して長距離秩序がないことが知られている [1] 。しかし、ある領域ではスピン波的に相関関数が冪乗的な挙動をする（相関距離無限大）となるので、相関距離有限な領域との間に相転移があるのではないかという予想され、ボルテックス対の解離というメカニズムで Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) 転移 [2, 3] が起きると議論された。さらに、繰り込み群から、BKT 転移では比熱の発散（自由エネルギーの異常）が見られず、また転移点では相関関数その他に対数補正があること [3] がわかった。

その後 BKT 転移の研究は実験でも数値計算でも進んできた。しかし、BKT 転移の有限サイズ補正は対数的なのでマクロな系でも無視できず [4]、実験でユニバーサルジャンプが鈍って見えるとか、数値計算で臨界指数が理論的予想と食い違っており、新種の相転移という解釈すらあった。

BKT 転移の対数補正の問題に関し、共形場理論 [5] と摂動論的繰り込み群 [6] と対称性に基づき、有限系の数値計算から得られる複数の励起から対数補正が打ち消し合う組合せをとることで、対数補正の困難を避けることに成功した（レベルスペクトロスコピー)。BKT 転移は連続的対称性のみでなく、離散的対称性とも関係しており、相関距離有限の領域での離散的対称性のない場合と、離散的対称性の破れを伴う場合は、同じ繰り込み群方程式で記述されるが臨界指数などは異なる。

S =1/2 の量子スピン鎖のように Neel,dimer オーダーのような Z_2 対称性の破れを伴う場合は、文献 [7] で議論した。この場合は各領域の最低励起の交差点がちょうど BKT 転移点に当たる。BKT 転移点決めた後に、各励起の対数補正除去する手続きもあるので、これにより予想されたユニバーサリティークラスに間違いがないかどうか、確認できる。

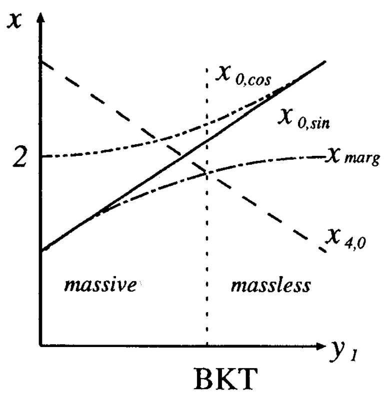


図 1: BKT 転移線近傍のスケーリング次元 x

S =1 の量子スピン鎖での Haldane 相のような対称性の破れのない相と XY 相の BKT 転移に関しては文献 [8] で議論した。この場合は BKT 転移の前後で繰り込み群の意味で irrelevannt から relevannt に変わる複数の物理量があることに注目し、これらの物理量の相関関数について摂動論的繰り込み群の計算を行なった。その結果、やはり幾つかの励起の交差点が BKT 転移点に当たることを見出した（図 1 参照)。さらに北沢のひねり境界条件法 [9] を使うことで隠れた $Z_2 \times Z_2$ 対称性を明確にでき、これと [8] を組み合わせて [10]、レベルスペクトロスコピーの精度の向上ができた。

ついでに、共形場理論でユニバーサリティークラスの分類に重要である、セントラルチャージ c という量を使うと、BKT 臨界領域では $c = 1$ であるが、そこから外れると急激に $c = 0$ へと減少することを見出した [11, 12]

なお、レベルスペクトロスコピー法と、磁化プラトー、電子系などへの応用に関しては、[13] と [14] にまとめておいたので、これらも参考にしていただきたい。

2　4体相互作用を伴う量子梯子系

BKT 転移とは別の種類の相転移であるが、連続的対称性を持つ量子 1 次元系 (4 体相互作用を伴う量子梯子系) において、離散的対称性の破れと連続的対称性が結び付いたケースを見つけたので、これを報告する [15]。この場合にも対数補正が存在するが、共形場理論で重要なセントラルチャージを利用することで、相転移点を精密に決めることができた。

2.1　モデル

我々の扱ったのは、以下の 4 体の循環的な相互作用 P, P^{-1} を持つ $s = 1/2$ 梯子系である。

$$\begin{aligned} H = \quad & J_{leg1} \sum_n \mathbf{S}_{1,n} \cdot \mathbf{S}_{1,n+1} + J_{leg2} \sum_n \mathbf{S}_{2,n} \cdot \mathbf{S}_{2,n+1} \\ & + J_{rung} \sum_n \mathbf{S}_{1,n} \cdot \mathbf{S}_{2,n} + J_{ring} \sum \left(P_{i,i+1} + P_{i,i+1}^{-1} \right) \end{aligned} \qquad (1)$$

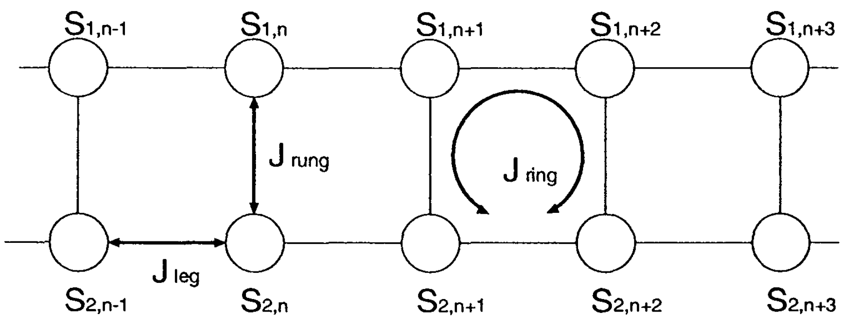
ここで、$P_{i,i+1}+P_{i,i+1}^{-1}$ のスピン演算子による表現は

$$
\begin{aligned}
P_{i,i+1}+P_{i,i+1}^{-1} &= \mathbf{S}_{1,i}\cdot\mathbf{S}_{1,i+1}+\mathbf{S}_{2,i}\cdot\mathbf{S}_{2,i+1} \\
&+\mathbf{S}_{1,i}\cdot\mathbf{S}_{2,i+1}+\mathbf{S}_{2,i}\cdot\mathbf{S}_{1,i+1}+\mathbf{S}_{1,i}\cdot\mathbf{S}_{2,i}+\mathbf{S}_{1,i+1}\cdot\mathbf{S}_{2,i+1} \\
&+4\{(\mathbf{S}_{1,i}\cdot\mathbf{S}_{2,i})(\mathbf{S}_{1,i+1}\cdot\mathbf{S}_{2.i+1}) \\
&+(\mathbf{S}_{1,i}\cdot\mathbf{S}_{1,i+1})(\mathbf{S}_{2,i}\cdot\mathbf{S}_{2,i+1})-(\mathbf{S}_{1,i}\cdot\mathbf{S}_{2,i+1})(\mathbf{S}_{2,i}\cdot\mathbf{S}_{1,i+1})\},
\end{aligned}
$$

で、各パラメーターは

- $1,2 \rightarrow$ 鎖の index
- $n \rightarrow$ サイト (鎖内での位置) の index
- J_{rung}:鎖間相互作用の結合定数
- J_{leg}:鎖内相互作用の結合定数
- J_{ring}:4 スピンの循環的相互作用の結合定数

である。4 体相互作用を含む項は、電子系にまで遡って考えると自然にでてくる。ハバー



ドモデルの強結合展開の 2 次の項から通常の 2 体スピン相互作用がでるが、展開の 4 次の項が 4 体スピン相互作用に当たる。なお、1 本鎖のハバードモデルでは、循環的相互作用がでない。

このモデルにつき、磁化 $M=\sum S_{\alpha,i}^{z}=0$ 、$J_{leg}=J_{rung}=1$ という条件の元で解析行なった。

2.2 セントラルチャージ

共形場理論より、臨界点で周期境界条件の元で、サイズ L の基底状態エネルギーは以下のように振舞う [16, 17]。

$$E_g(L)=\epsilon L-\frac{\pi v c}{6L}, \tag{2}$$

ここで、

- E_g: 基底状態のエネルギー
- ϵ: 無限系におけるサイト当りのエネルギー
- v: 素励起の速度
- c: セントラルチャージ
- L: システムサイズ $(6, 8, 10, 12)$

である。

ところで、セントラルチャージを求める為には、基底状態エネルギーばかりでなく、素励起の速度 $v(\omega = v\,|q|)$ を求めなくてはならない。数値的に素励起の速度 v を以下のようにして求めた。

- 素励起の速度 v

$$v(L) = \frac{L}{2\pi}\left[E\left(q = \frac{2\pi}{L}\right) - E\left(q = 0\right)\right],$$

- $\Rightarrow$ サイズ依存性を持つ

$$v(L) = v + a\frac{1}{L^2} + b\left(\frac{1}{L^2}\right)^2 + \text{higher order.}$$

v: 無限系での素励起の速度

このようにして求めた素励起の速度と基底状態エネルギーから、有効セントラルチャージは以下の図のようになる [15]。ここで、$J^c_{ring} = 0.192$ 付近で有効セントラルチャージ極大となり、その値は $c = 3/2$ となる。これは系の持つ SU(2) 対称性と組み合わせると SU(2) k=2 Wess-Zumino-Witten (WZW) [18] モデルと解釈される。なお、J^c_{ring} 以外で $c = 3/2$ より小さな値とるのは、off-critical な点に関する Zamolodchikov の c 定理 [19] から説明される。

2.3 スケーリング次元 (臨界指数)

SU(2) $k = 2$ の WZW モデルということから、他の臨界指数について議論する。臨界指数に関係するスケーリング次元は [18]、

- $x = \frac{3}{8}$ パリティ 奇、 波数 π
- $x = 1$ パリティ 偶、 波数 0
- $x = 2$ パリティ 偶、 波数 0、marginal

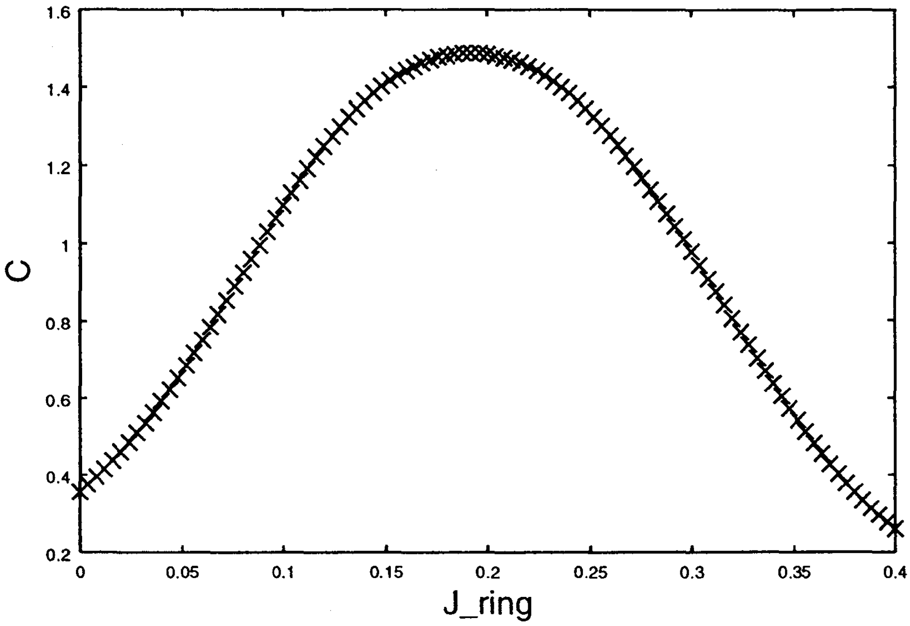


図 2: 有効セントラルチャージの振舞い

となり、これらから、Z_2 対称性の破れを伴う 2 次転移で、相関距離は $\xi \propto |J_{ring} - J_{ring}^c|^{-1}$ と振舞う。

周期的境界条件における有限サイズ系における励起エネルギーはスケーリング次元と [20]

$$\Delta E_i = E_i - E_0 = \frac{2\pi v}{L} x_i$$

のように関係づけられる。

ただし、連続的対称性で marginal $x = 2$ というものがあることを反映し、対数補正がある。これらを除去した後、$x = 3/8$ を確認した [15]。

参考文献

[1] N. D. Mermin and H. Wagner: Phys. Rev. Lett., **17** (1966) 1133.

[2] Z. L. Berezinskii: Zh. Eksp. Teor. Fiz., **61** (1971) 1144 (Sov. Phys. JETP, **34** (1972) 610).

[3] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless: J. Phys. C, **6** (1973) 1181; J. M. Kosterlitz: J. Phys. C, **7** (1974) 1046.
なお、前者の繰り込み群方程式は誤っており、後者で正しく導かれた。

[4] $2^{14} = 16384$ という極めて大きな系でも、対数補正の影響残る。
K. Nomura: Phys. Rev. B **48** (1993) 16814.

[5] 共形場理論のレビューとして "Fields, strings and critical phenomena", ed. Brezin and Zinn-Justin (Les-Houches 1988 XLIX), 特に Ginsparg の解説

(http://arxiv.org/hypertex/ からも Ginsparg のレビュー入手可能)。「共形場理論と 1 次元量子系」川上 則雄・梁 成吉 著 (岩波書店)。

[6] "Scaling and Renormalization in Statistical Physics" by J. L. Cardy (Cambridge, 1996).

[7] K. Nomura and K. Okamoto: J. Phys. A **27** (1994) 5773.

[8] K. Nomura: J. Phys. A **28** (1995) 5451.

[9] A. Kitazawa, J. Phys. A **30** (1997) L285.

[10] K. Nomura and A. Kitazawa: J. Phys. A **31** (1998) 7341.

[11] H. Inoue and K. Nomura: Phys. Lett. A, **262** (1999) 96.

[12] H. Inoue: Phys. Lett. A **270** (2000) 359.

[13] 野村 清英、岡本 清美: 日本物理学会誌、56 巻、(2001) pp. 836

[14] K. Nomura and A. Kitazawa: pp. 191 in "Quantum Properties of Low-Dimensional Antiferromagnets", ed. by Y. Ajiro and J-P. Boucher (Kyushu University Press, 2002), or cond-mat/0201072

[15] K. Hijii and K. Nomura: Phys. Rev. B, Vol. 65, (2002) pp. 104413

[16] H. W. J. Blöte, J. L. Cardy, and M. P. Nightingale: Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 742.

[17] I. Affleck: Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 746.

[18] I. Affleck, J. Gepner, H. J. Schulz, and T. L. Ziman: J. Phys. A, **22** (1989) 511

[19] A. B. Zamolodchikov: Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **43** (1986) 565 [JETP Lett. **43** (1986) 730]

[20] J. L. Cardy: J. Phys. A **17** (1984) L385.